



TITLE:

13. カノニカル相関による波動関数の特徴付け(基研短期研究会報告「非可積分系の量子力学」,研究会報告)

AUTHOR(S):

水谷, 正大; 首藤, 啓; 深井, 朋樹

CITATION:

水谷, 正大 ...[et al]. 13. カノニカル相関による波動関数の特徴付け(基研短期研究会報告「非可積分系の量子力学」,研究会報告). 物性研究 1988, 49(5): 479-481

ISSUE DATE:

1988-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/92935>

RIGHT:

produced by multiphoton transitions. In particular we show the existence of a large ionization peak at frequencies much below those required for the conventional one-photon photoelectric effect. This peak can, for suitable parameters values, be much higher than that of the usual photoelectric effect and its frequency width is jointly determined by two independent effects: the classical chaotic threshold and the quantum delocalization border.

13. カノニカル相関による波動関数の特徴付け

早大・理工 水 谷 正 大

早大・理工 首 藤 啓

Tata Fund. Res. Inst. 深 井 朋 樹

量子力学系において、系 S_1 と S_2 の結合系 $S = S_1 + S_2$ の状態は各系の状態空間のテンソル積 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ の点として表わされ、一般の状態は $\{\phi_i\}$, $\{\theta_j\}$ をそれぞれ \mathcal{H}_1 , \mathcal{H}_2 の完全直交基底とすると、

$$\phi^S = \sum_{ij} a_{ij} \phi_i \theta_j$$

と表わされ各部分系は互いに独立でなく一般に相関をもつ。古典力学系では各部分系が僅かな相互作用によって結合している場合（近可積分系）一般的には相空間においてトーラスは僅かに変形するが、その上で系は概周期運動を続けることが知られている（KAMの定理）。

本研究では量子力学系において各部分系の相互作用の結果として、結合系はいかなる影響を受けるかを波動関数の性質として調べることを目的としている。その方法としてここでは Everett が提出した相対表示を用いた正準相関の方法¹⁾により以下の量子力学のモデルを調べた。

$$H = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + \alpha(Ax^4 + 2cx^2y^2 + By^4), \quad \alpha, A, B > 0$$

$x-y$ 座標を各部分系に選ぶこととし、 $c=0$ のとき変数分離系であることを注意しておく。

ϕ^S を結合系 $S = S_1 + S_2$ の状態としたとき、 S_2 における状態 η に対する S_1 における相対状

態 ϕ^S は

$$\phi_{\text{rel}}^\eta \equiv N \sum_i \langle \phi_i | \eta | \phi^S \rangle \phi_i$$

で定義される。このとき結合系の状態 ϕ^S は

$$\phi^S = \sum_j \frac{1}{N_j} \phi_{\text{rel}}^{\theta_j} \theta_j, \quad \frac{1}{N_j} = \sum_i \langle \phi_i | \theta_j | \phi^S \rangle^2$$

と single superposition で表わされる。密度行列 $\rho^S = |\phi^S\rangle\langle\phi^S|$ に関して ρ^{S_1}, ρ^{S_2} が対角形にとれる表示が存在し、この表示のもとで ϕ^S は相対状態表示された single superposition で表わされる (正準表示)。実際 $\rho^{S_1} \equiv \text{trace}_{S_2} \rho^S = \sum_{ik} (AA^\dagger)_{ik} |\phi_i\rangle\langle\phi_k|$, $\rho^{S_2} \equiv \text{trace}_{S_1} \rho^S = \sum_{lj} (A^\dagger A)_{lj} |\theta_j\rangle\langle\theta_l|$, $(A)_{ij} = a_{ij}$ とすると, $AA^\dagger, A^\dagger A$ を対角化する行列 U, V が存在し, $\tilde{A} = U^{-1}AU$ は $(\tilde{A})_{ik} = a_i \delta_{ik}$ となる。このとき $\rho^{S_1} = \sum_m a_m a_m^* |\tilde{\phi}_m\rangle\langle\tilde{\phi}_m|$, $\rho^{S_2} = \sum_m a_m a_m^* |\tilde{\theta}_m\rangle\langle\tilde{\theta}_m|$ と対角形になり ϕ^S も $\phi^S = \sum_m a_m \tilde{\phi}_m \tilde{\theta}_m$ と表わされる。このとき, \tilde{A}, \tilde{B} をそれぞれ S_1, S_2 の作用素と想定し, それぞれ非縮退固有関数 $\{\tilde{\phi}_i\}, \{\tilde{\theta}_j\}$ と固有値 $\{\lambda_i\}, \{\mu_j\}$ をもつとしたとき, これらは固有値間で1対1の対応 $P(\lambda_i | \mu_j) = P(\tilde{\phi}_i | \tilde{\theta}_j) = a_i a_i^* \delta_{ij} = P_i \delta_{ij}$ があるという意味で完全に相関し合っている。正準表示を与えるこれら S_1 と S_2 の非縮退部分系の作用素間の相関を正準相関と呼び,

$$\{S_1, S_2\} \phi^S \equiv - \sum_i P_i \ln P_i, \quad P_i = a_i^* a_i$$

で定義する。正準相関は部分系から成る結合系固有の相関を表わしている。

我々の計算ではモデル系を使って固有値問題 $H\phi^S = E\phi^S$ を Hermite 基底 $\{H_i\}$ を用いて数値計算して, $\phi^S(x, y) = \sum_{ij} a_{ij} H_i(x) H_j(y)$ を求めている。図1は結合系の各エネルギー固有状態に対して正準相関を計算し下から100番目までのものについて平均したものである。パラメータ C に対して $C=0$ の変数分離系のまわりで非常に敏感であることが見てとれる。波動関数 ϕ^S のパターンは C に関してこのように敏感に変化しないことが分っているが, 実際には量子力学的状態は僅かな相互作用に対して強い相関を含むことを示している。図2は1組の隣接

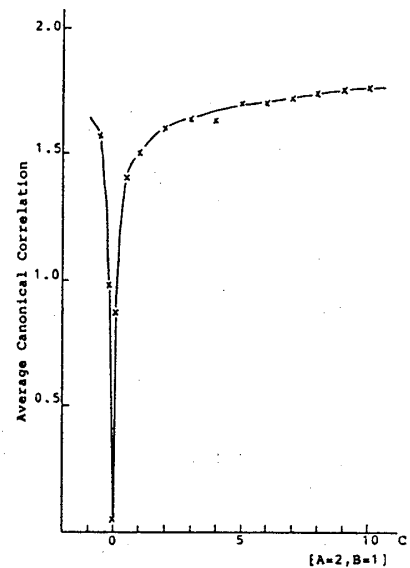


図1 正準相関の平均値

しているエネルギー・レベルでパラメータ C の変化に対して avoided crossing を呈している場合の正準相関を計算したものである。avoided crossing を呈している場所で正準相関は飛びがあり, avoided crossing の前後で量子状態は単なる交換でないことを示唆している。

参考文献

- 1) S. DeWitt & N. Graham (eds) *The Many World Interpretation of Quantum Mechanics*, Princeton Univ. Press, 1973.

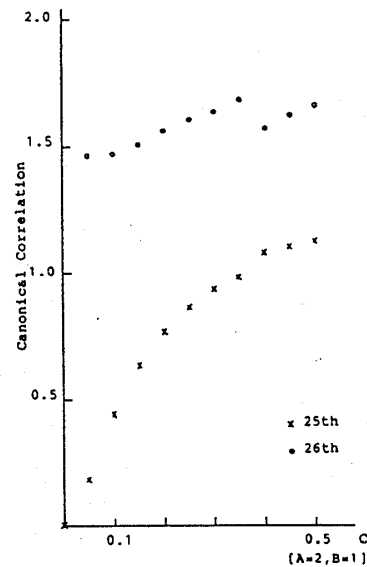


図2 Avoided crossing 前後での隣接するレベルの正準相関

14. ランダム系の量子状態と拡散

新潟大・工 合 田 正 毅

ランダム系の量子拡散の理論的研究は P. W. Anderson¹⁾ に始まり約 30 年の歴史を持ち量子拡散の有無に関しては正確な議論が成されているので, 量子カオスとの関係を求めて, それらを簡単に紹介した。

簡単のため強結合近似での一電子系

$$H = \sum_l |l\rangle \varepsilon_l \langle l| + \sum_{l \neq l'} |l\rangle t_{l,l'} \langle l'|$$

を考える。ここに対角項 $\{\varepsilon_l\}$, 非対角項 $\{t_{l,l'}\}$ は一般に確率変数とする。従ってハミルトニアン²⁾の集合に対して確率 1 で成り立つ性質が問題となる。時刻 $t = 0$ で $a_n(0) = \delta_{n,0}$ なる初期条件を与え波束の運動 $\phi(t) = \sum_n a_n(t) |n\rangle$ を考え $P_n(t) = |a_n(t)|^2$ とするとき, 確率 1 で $P_0^\infty \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} P_0(t) > 0$ かどうかを問題とし, P_0^∞ が正なら拡散不在と定義する¹⁾。 $P_0^\infty = 0$ の場合でも $P_0(t)$ が充分ゆっくり減衰すれば $\int_0^\infty P_0(t) dt = \infty$ が確率 1 で起り得る。これを弱拡散不在と定義する²⁾。